



TITLE:

Conjugated Hydrocarbon
DiradicalsのGround Stateの電子状
態(修士論文アブストラクト(昭和
52年度))

AUTHOR(S):

橋本, 勝文

CITATION:

橋本, 勝文. Conjugated Hydrocarbon DiradicalsのGround Stateの電子状態(修士論文アブストラクト(昭和52年度)). 物性研究 1978, 30(1): 42-43

ISSUE DATE:

1978-04-20

URL:

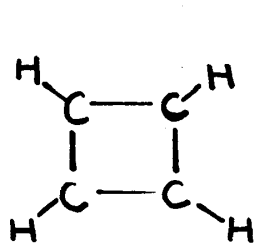
<http://hdl.handle.net/2433/89526>

RIGHT:

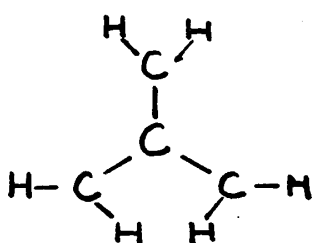
Conjugated Hydrocarbon Diradicals の Ground State の電子状態

橋 本 勝 文

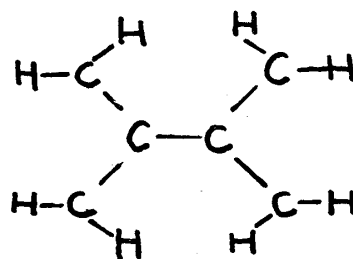
Conjugated diradicals は 2つの nonbonding π 軌道に 2つの電子が入っている分子である。ここでは、その例として cyclobutadiene(I), trimethylenemethane(II) , tetramethylenethane(III) をとりあげる。



(I)

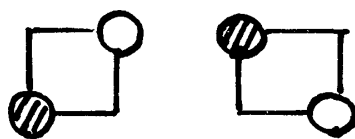


(II)

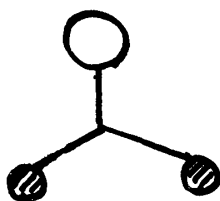


(III)

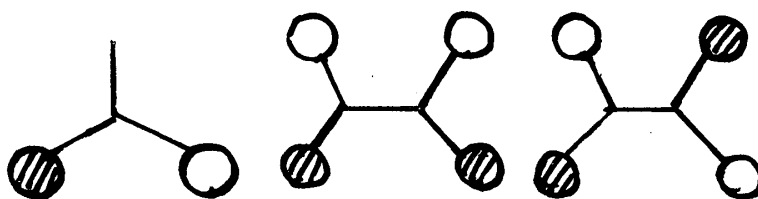
(I) (II) (III) とともに紙面に垂直に炭素の p_z 軌道が立っている。(I) (II) (III) の nonbonding π 軌道を図 1 に示す。



(I)



(II)



(III)

図 1

ここで○, ●は π 軌道の各炭素原子 p_z 軌道での係数で○は+, ●は一, 丸の大きさは係数の大きさを示す。(I) (II) (III) いずれも Hückel 分子軌道 (HMO) の最高占有軌道 (HOMO) と最低空軌道 (LOMO) のエネルギーは縮退しているか, あるいはほとんど縮退している。このような系は, 制限 Hartree-Fock 近似で考えると triplet が ground state になる。しかし HOMO と LOMO のエネルギーギャップが小さく電子相関の効果が大きく, 事情は複雑になる。ここでは非制限 Hartree-Fock 近似を用い電子相関の効果を取り入れて計算した。その結果, (I) (III) は singlet が ground state, (II) は triplet が ground state になった。そのスピン構造を図 2 に示す。

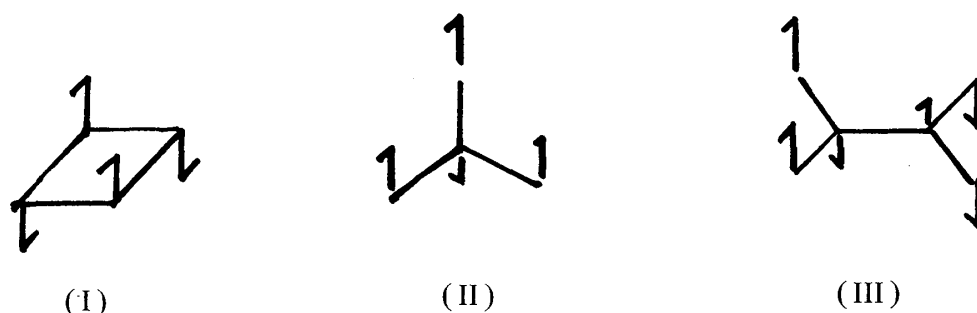


図 2 (↑, ↓は矢印を表わす)

ここで↑の向きと長さはスピン密度のスピン空間での向きと大きさを示す。このように, conjugated Hydrocarbon diradicals の ground state は電子相関の結果 alternating spin structure を持つ状態であることが予想される。

CW 色素レーザーの製作とそれを用いた Na₂A バンドの Polarization 分光

早 川 雅 博

Ar レーザー励起 CW 色素レーザーを製作し, それと他の Ar レーザーを用いて, Na₂A バンドの高振動励起状態 ($v' = 15 \sim 35$) の分光を Polarization spectroscopy の方法によって行なった。

CW 色素レーザーは可視領域で広範囲に波長選択可能なコヒーレント光源として最近